

Title	まえがき(強結合電子・格子系の動的物性,科研費研究会報告)
Author(s)	豊沢, 豊
Citation	物性研究 (1982), 38(2): A1-A2
Issue Date	1982-05-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/90612
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

科研費研究会報告

強結合電子・格子系の動的物性

昭和56年度 文部省科学研究費 総合研究 A

研究会報告書

目次

まえがき

豊沢 豊 1

I. 分子とその集合体

光電子移動とそれに伴う構造変化の諸問題

又賀 昇 3

二つの光パルスを用いた低温光化学反応の促進

吉原経太郎 6

有機化合物の励起スペクトルの振動解析

木下 實 8

アモルファスアントラセンの蛍光

小林孝嘉 11

II. 電子-格子相互作用

格子振動の場での電子及び励起子の動的性質

松浦 満 14

中間結合電子-格子系での若干の問題点

黒沢達美 17

III. 局在中心と無輻射遷移

アルカリハライド結晶中の無輻射遷移過程

平井正光, 脇田昭平 19

F中心蛍光における磁気円偏光分極度

大倉 薫 22

多重フォノン無輻射遷移の動力学

萱沼洋輔 26

多フォノン無輻射過程におけるLandau-Zener公式の重要性

佐 齊 29

非断熱過程を含む吸着子の動力学

塚田 捷 32

光合成系における分子間電子移動

右衛門佐重雄 35

IV. 光の共鳴散乱とホットルミネッセンス

極めて短いパルス光の共鳴散乱について

久保亮五 38

NaNO_2 における共鳴二次光放出

加藤利三 41

V. 励起子の格子緩和と欠陥生成

分子性結晶における自由励起子の緩和

松井敦男, 西村 仁 44

絶縁体結晶にみられる光励起エネルギーの転換過程

神前 熙 47

カドミウムハライドに於ける励起子の緩和

越野茂美, 林 哲介, 大島トキ子 50

アルカリ次化物におけるホット励起子スペクトル

西村 仁 53

三重励起分光法によるイオン結晶の光化学反応

伊藤憲昭 56

偏光紫外線励起によるアルカリハライドの発光と着色

神野賢一, 中井祥夫 59

Ⅶ 半導体の格子緩和

化合物半導体混晶における欠陥準位と欠陥反応	柊元 宏	62
光音響分光法による半導体の欠陥状態と欠陥生成の研究 および		
電流注入音響法による半導体レーザーの非発光過程の研究	御子柴宣夫	64
アモルファス半導体の光構造変化の機構の研究	田中一宣	67
アモルファス As_2S_3 の光構造変化とガラス転移	二宮敏行, 木村 薫, 中田弘章	70
非晶質半導体の電子格子緩和と欠陥状態	森垣和夫	72
レーザーアニール機構の研究	難波 進	75
半導体のパルスレーザーアニール機構	村上浩一	78

Ⅷ 電荷移動と構造相転移

電荷移動型錯体励起子の格子緩和	十倉好紀, 国府田隆夫	81
分子結晶の励起状態における電子・格子相互作用と動的過程	田仲二郎	84
ハロゲン架橋混合原子価鎖状結晶の光励起と緩和	小林浩一	87
一次元パイエルス-ハバード系の光物性	那須奎一郎	89
構造相転移と光応答	永長直人, 花村榮一	92

ま え か き

分子から凝縮系、表面までも含む多様な系で電子状態と原子配位がからみ合っ
て起る様々な動的過程の相互の間に、多くの共通点、類似点のあることが、物性物理から化学にわたる諸分野の研究者の間でいっからともなく意識されるようになってきた。そのような流れの中で、分野ごとに異なる言葉と発想法のバリエーションを乗り越えて共通の広場をもち、統合的、統一的な視点をとぐってみたい、というのがこの総合研究班が組織された趣旨の一つである。もとより問題自体が基本的であるとともに広範にわたるため、関心を持つ研究者は極めて多いと思われるが、我々はまずある程度共通の問題意識をもち有識の集まりから出発することにした。共通の広場をつくり情報と意見を交換するための全体研究会は、研究分担者、協力者のほか、数名のゲストの参加も得て、昭和56年11月9日から11日にわたり、箱根静雲荘で行なわれた。本報告は、そこでの講演および討議内容と主体としてその後の研究成果も含めた、各メンバー乃至グループの報告書とまとめたものである。目次にも見られるように、ここで対象とした系は極めて広範、多岐にわたるが、全体の概観と、その背景にある共通の問題意識について、多少の主観もまじえながら、ここに簡単に記しておきたい。

分子や固体内局在中心のように拡がりの小さい系は、光励起を受けると電荷分布が局所的に著しく変り、その変化分に応じた力を受けて各原子の平衡位置が変る。この緩和のダイナミックスに因しては、吸収および発光スペクトルの幅と振動構造、共鳴光散乱とホットルミネッセンス、時間分解分光などから豊富な情報が得られる。固体の場合、各原子の変位は格子振動モードの1次結合としてあらわされるため、電子状態と原子運動のからみ合いは電子-格子相互作用とよばれる。ここでは便宜上この言葉と分子の場合にも適用することにした。

さて光学的遷移による電荷分布変化の最も著しい場合として1つの原子または分子団から他のそれへ電子が移動するときは、それに応じた格子緩和の結果、新しい化合物が得られる(光化学反応)こともあり、また本来はある対称性をもつ系で、光励起後の格子緩和が電荷移動をひき起しつつ対称性のやぶれた状態に落ち着くこともある。このような強結合の状態は、極性溶媒中の分子でしばしばあらわれるようである。また緩和の途次、別の電子状態と交差して無輻射過程を起すこともあり、これに因しては理論的にも難しい問題が色々ある。

バルクの絶縁体結晶(拡がりの大きい系)を光励起したときでる電子、正孔、励起子などは、併進対称性により結晶内を走りまわらるため、電子-格子相互作用はかなりの部分受け渡され、これらの粒子にフォノンの着物を着せたり、時たまそれらを散乱させるという状況——電子-格子の弱または中間結合——が普通だが、相互作用の強さがある限界を越えようと、これらの粒子は自己束縛を起し、分子や固体内局在電子と同様の、強結合の状態があらわれる。このような物質も多く知られている。これは併進対称性のやぶれであるが、アルカリハライドではこれが更に偶奇性のやぶれに導く場合もあり、自己束縛励起子の電子・正孔への分裂と正・負イオンの格子欠陥対生成が起る。これはまた、

正・負イオンが電子・正孔をものとすやに収めて中性原子にかえる、という酸化・還元過程とみることもできる。ハロゲン化銀の写真感光現象も、ハロゲンガスと遊離銀になるという意味で、本質的には類似の過程といえる。

バンドギャップの小さい典型的な半導体では電子-格子相互作用も一般に小さく、上記のような強結合の状況は不純物に局在した電子にすら起らない、という永年の常識もやぶられた。深い不純物準位や再結合中心を足場として電子が格子と強くやりとりし（そのエネルギー源は電子-正孔再結合のエネルギーである）、格子欠陥反応ともひき起こすことが、半導体レーザー劣化という応用上の問題と関連して明らかにされた。アモルファス半導体では構造上の自由度にからむと思われる独自の格子緩和が様々な現象にあらわれており、その自由度の受体をミクロレベルで明らかにすることが、一つの重要課題となっている。

さて励起子の格子緩和エネルギーが大き過ぎて、結晶の緩和励起状態が基底状態より低くなるような状況も考えられなくはない。この場合は光励起をまたずとも緩和励起子が自発的に各サイトに発生し、相転移をひき起こすであろう。当然、相転移後の状態が真の基底状態であり、出発点にたった基底状態とは構造も電子状態も異っている。ある種の電荷移動錯体、混合原子価結晶はこのようなものと考えることもできる。結晶のあるがままの基底状態とそれ単独にとらえるのではなく、可能な励起状態も含めたグローバルな状態空間に対する断熱ポテンシャル（その横軸となる配位座標は、今の場合、バルクの構造変化に対応するオーダー・パラメーター）の中でとらえることは、物質の存在形態を考える上で一つの視点を与えてくれる。光励起とその格子緩和のダイナミックスの研究は、このような深淵とのかせながら、やがてバルクの相転移の問題にもつながってゆくのである。

(研究代表者 豊次 豊)